

## PATENT ABSTRACTS OF JAPAN

(11)Publication number : 2000-340476

(43)Date of publication of application : 08.12.2000

(51)Int.Cl.

H01L 21/00  
G06F 17/50  
H01L 21/3065

(21)Application number : 11-150760

(71)Applicant : SEMICONDUCTOR LEADING EDGE  
TECHNOLOGIES INC

(22)Date of filing : 28.05.1999

(72)Inventor : FUJINAGA MASATO  
KOTANI KYOHIKO

## (54) SHAPE SIMULATION METHOD, APPARATUS AND STORAGE MEDIUM

## (57)Abstract:

PROBLEM TO BE SOLVED: To minimize the storage capacity by forming the lattice only to the area near the interface that is required to express the shape of a substance and then repeating a plurality of times the generation of lattice and update of shape until the shape calculation is totally completed for each period after the update of the shape of field.

SOLUTION: In the shape simulation for the interface of a substance, the area near the interface of a substance is divided using the lattice of the predetermined shape surrounded with the lattice line connecting the lattice points and then the interface division indicating the shape of the interface of a substance by connecting the top points placed on the lattice line. Next, the characteristic value is stored to store the characteristic value indicating the characteristic of the substance at the area near the lattice point to the lattice point, the characteristic value stored in the lattice point is updated for every predetermined time, and the shape of the interface of a substance is updated by updating the position of the top point of the substance for every predetermined time. Here, when the interface of substance is indicated two-dimensionally, the 4 min. tree lattice division is executed and it is indicated three-dimensionally, the 8 min. tree-lattice division is executed.

## LEGAL STATUS

[Date of request for examination] 03.06.1999

[Date of sending the examiner's decision of rejection]

[Kind of final disposal of application other than the examiner's decision of rejection or application converted registration]

[Date of final disposal for application]

[Patent number] 3388203

[Date of registration] 10.01.2003

[Number of appeal against examiner's decision of rejection]

[Date of requesting appeal against examiner's decision of rejection]

[Date of extinction of right]

Copyright (C); 1998,2003 Japan Patent Office

(11)特許出願公開番号  
特開2000-340476  
(P2000-340476A)

(43)公開日 平成12年12月8日(2000.12.8)

(51)Int.Cl. <sup>7</sup>	識別記号	F I	テマコード <sup>*</sup> (参考)
H 0 1 L 21/00		H 0 1 L 21/00	5 B 0 4 6
G 0 6 F 17/50		G 0 6 F 15/60	6 1 2 H 5 F 0 0 4
H 0 1 L 21/3085		H 0 1 L 21/302	A

審査請求 有 請求項の数16 OL (全 13 頁)

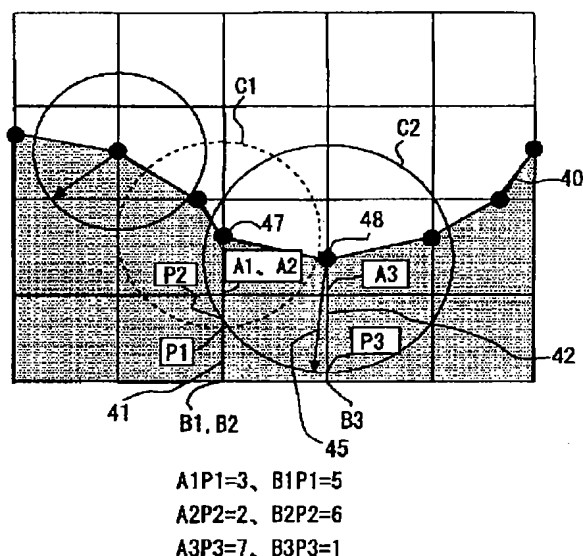
(21)出願番号	特願平11-150760	(71)出願人	597114926 株式会社半導体先端テクノロジーズ 神奈川県横浜市戸塚区吉田町292番地
(22)出願日	平成11年5月28日(1999.5.28)	(72)発明者	藤永 正人 神奈川県横浜市戸塚区吉田町292番地 株 式会社半導体先端テクノロジーズ内
		(72)発明者	小谷 教彦 神奈川県横浜市戸塚区吉田町292番地 株 式会社半導体先端テクノロジーズ内
		(74)代理人	100082175 弁理士 高田 守 (外2名) Fターム(参考) 5B046 AA08 BA05 BA08 DA05 FA04 FA06 GA01 JA02 JA04 5F004 AA16 DB01 DB03

(54)【発明の名称】 形状シミュレーション方法、装置および記録媒体

(57) 【要約】

【課題】 物質の形状シミュレーション方法において記憶容量を必要以上に要することがない形状シミュレーション方法、装置及び記録媒体を提供する。

【解決手段】 物質の形状を表わすのに必要な界面付近だけに格子を生成して界面の形状を更新し、格子の生成および形状の更新を所定の時間毎に形状計算がすべて終了するまで複数回繰り返す。形状の更新については、頂点から発生させた円等の小形状と格子線との交点を求め、該交点における特性値を0.5として交点を挟む格子点における物質の材質構成比等の特性値を求める。特性値が等値である等値面により更新後の界面の形状を表現できる。格子点を囲む四面体内のコントロールボリュームをさらに複数の四面体に分割して等値面（物質表面）を計算し、物質表面に流入／流出する物質量を格子点に流入／流出する物質量として、格子点における体積率を短い時間 $\Delta t$ 毎に更新することができる。



40: 形状、  
41, 42: 格子線  
45:  $v \Delta t$  ( $v$ : エッチング速度、 $\Delta t$ : 微小時間ステップ幅)  
A1-A3, B1-B3: 格子点、C1, C2: 円、P1-P3: 交点

## 【特許請求の範囲】

【請求項1】 物質の界面の形状をシミュレーションする形状シミュレーション方法において、

物質の界面近傍を格子点と該格子点を結ぶ格子線とにより囲まれた所定の形状の格子を用いて分割し、物質の界面の形状を該格子線上に置かれた頂点を結んで表す界面分割ステップと、

格子点近傍における物質の特性を示す特性値を該格子点に記憶させる特性値記憶ステップと、

格子点に記憶された特性値を所定の時間毎に更新し、該所定の時間毎に物質の界面の形状が更新される形状更新方向へ該頂点の位置を更新して物質の界面の形状を更新する形状更新ステップとを備えたことを特徴とする形状シミュレーション方法。

【請求項2】 請求項1記載の形状シミュレーション方法において、前記界面分割ステップは、物質の界面が2次元で表わされている場合に、前記格子点から前記格子線が4分木で分岐する分割を行うことを特徴とする形状シミュレーション方法。

【請求項3】 請求項1記載の形状シミュレーション方法において、前記界面分割ステップは、物質の界面が3次元で表わされている場合に、前記格子点から前記格子線が8分木で分岐する分割を行うことを特徴とする形状シミュレーション方法。

【請求項4】 請求項1記載の形状シミュレーション方法において、前記特性値記憶ステップは、物質の界面近傍の格子のみを囲む格子点に特性値を記憶させることを特徴とする形状シミュレーション方法。

【請求項5】 請求項1記載の形状シミュレーション方法において、前記特性値は格子点近傍の材質の割合を示す物質構成比であり、

前記形状更新ステップは、頂点を基準として所定の小形状を発生させ、形状更新方向において該所定の小形状と格子線との交点を求め、該交点を挟む2個の格子点に各々記憶された物質構成比が該交点において等値となるように線形補間法により各々更新し、物質構成比が等値となった該交点を新たな頂点として更新して物質の界面の形状を更新することを特徴とする形状シミュレーション方法。

【請求項6】 請求項5記載の形状シミュレーション方法において、前記形状更新ステップは、前記格子線上に複数の交点が求められた場合に、前記形状更新方向が物質の界面から見て内側方向である場合は、複数の交点から得られる物質構成比の内最小の物質構成比により更新することを特徴とする形状シミュレーション方法。

【請求項7】 請求項5記載の形状シミュレーション方法において、前記形状更新ステップは、前記格子線上に複数の交点が求められた場合に、前記形状更新方向が物質の界面から見て外側方向である場合は、複数の交点から得られる物質構成比の内最大の物質構成比により

更新することを特徴とする形状シミュレーション方法。

【請求項8】 請求項1記載の形状シミュレーション方法において、前記特性値は格子線上の所定の点から該所定の点を挟む2個の格子点までの各距離であり、前記形状更新ステップは、物質の界面を前記形状更新方向へ所定の距離移動させた場合に、該物質の界面と移動させた所定の距離とから形成される多面体の表面と格子線との交点を求め、該交点から該交点を挟む2個の格子点までの各距離を該格子点が該多面体の内部にある場合は正とし該多面体の外部にある場合は負として求めて、各格子点に記憶させる新たな特性値として更新することを特徴とする形状シミュレーション方法。

【請求項9】 請求項8記載の形状シミュレーション方法において、前記格子点に複数の距離が求められた場合は、複数の距離の平均値により更新することを特徴とする形状シミュレーション方法。

【請求項10】 請求項1記載の形状シミュレーション方法において、前記界面分割ステップは、物質の界面を3次元で表わし該界面近傍を格子点から格子線を8分木で分岐させて所定の形状の格子に分割し、該格子毎に頂点を含み正の体積を有するコントロールボリュームを定義し、

前記特性値記憶ステップは、前記コントロールボリューム内における前記頂点を含む所定の体積が該コントロールボリュームの体積に対して占める割合を求め、該割合を物質構成比を示す特性値として格子点に記憶させ、前記形状更新ステップは、前記頂点を含む所定の体積に対して物質構成比が等値となる等値面を求め、該等値面に対して前記形状更新方向へ流れ込む物質量を前記頂点へ流れ込む物質量として求め、該流れ込む物質量により格子点に記憶された物質構成比を更新して物質の界面の形状を更新することを特徴とする形状シミュレーション方法。

【請求項11】 請求項1ないし10のいずれかに記載の形状シミュレーション方法において、前記形状シミュレーション方法は、半導体のプロセス設計における素子の形状シミュレーション方法であり、前記形状更新方向は、エッチングプロセスの場合は物質の界面からみて内側方向であり、薄膜堆積プロセスの場合は物質の界面からみて外側方向であることを特徴とする形状シミュレーション方法。

【請求項12】 請求項1ないし11のいずれかに記載された形状シミュレーション方法を実行するためのプログラムを記録したコンピュータ読み取り可能な記録媒体。

【請求項13】 物質の界面の形状をシミュレーションする形状シミュレーション装置において、物質の界面近傍を格子点と該格子点を結ぶ格子線とにより囲まれた所定の形状の格子を用いて分割し、物質の界面の形状を該格子線上に置かれた頂点を結んで表す界面

分割手段と、格子点近傍における物質の特性を示す特性値を該格子点に記憶させる特性値記憶手段と、格子点に記憶された特性値を所定の時間毎に更新し、該所定の時間毎に物質の界面の形状が更新される形状更新方向へ該頂点の位置を更新して物質の界面の形状を更新する形状更新手段とを備えたことを特徴とする形状シミュレーション装置。

【請求項14】 請求項13記載の形状シミュレーション装置において、前記特性値は格子点近傍の材質の割合を示す物質構成比であり、

前記形状更新手段は、頂点を基準として所定の小形状を発生させ、形状更新方向において該所定の小形状と前記格子線との交点を求め、該交点を挟む2個の格子点に各々記憶された物質構成比が該交点において等値となるように線形補間法により各々更新し、物質構成比が等値となった交点を新たな頂点として更新して物質の界面の形状を更新することを特徴とする形状シミュレーション装置。

【請求項15】 請求項13記載の形状シミュレーション装置において、前記特性値は格子線上の所定の点から該所定の点を挟む2個の格子点までの各距離であり、前記形状更新手段は、物質の界面を前記形状更新方向へ所定の距離移動させた場合に、該物質の界面と移動させた所定の距離とから形成される多面体の表面と格子線との交点を求め、該交点から該交点を挟む2個の格子点までの各距離を該格子点が該多面体の内部にある場合は正とし該多面体の外部にある場合は負として求めて、各格子点に記憶させる新たな特性値として更新することを特徴とする形状シミュレーション装置。

【請求項16】 請求項13記載の形状シミュレーション装置において、前記界面分割手段は、物質の界面を3次元で表わし該界面近傍を格子点から格子線を8分木で分岐させて所定の形状の格子に分割し、該格子毎に前記頂点を含み正の体積を有するコントロールボリュームを定義し、前記特性値記憶手段は、前記コントロールボリューム内における前記頂点を含む所定の体積が該コントロールボリュームの体積に対して占める割合を求め、該割合を物質構成比を示す特性値として格子点に記憶させ、前記形状更新手段は、前記頂点を含む所定の体積に対して物質構成比が等値となる等値面を求め、該等値面に対して前記形状更新方向へ流れ込む物質量を前記頂点へ流れ込む物質量として求め、該流れ込む物質量により格子点に記憶された物質構成比を更新して物質の界面の形状を更新することを特徴とする形状シミュレーション装置。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【発明の属する技術分野】本発明は、形状シミュレーシ

ョン方法に関し、特に半導体またはLSIの開発製造を支援する形状プロセスシミュレーション方法、装置および記録媒体に関する。

【0002】

【従来の技術】半導体またはLSIの開発製造において、デバイス（素子）の試作とその電気的特性の評価は回路設計またはパターン設計の上で重要であるが、試作により長い時間と多くのコストとを要するためコンピュータを用いたシミュレーションが行われている。シミュレーションにはデバイスの試作シミュレーションを行うプロセス・シミュレーションとデバイスの電気的特性を評価するデバイス・シミュレーションとがある。LSIプロセス技術において重要な工程であるエッチング工程と薄膜堆積工程とはデバイス（素子）の形状等を定める工程であるが、幾何学的には同一の問題と考えられるため、プロセス・シミュレーションにおける形状シミュレーションにより取り扱われている。特開平4-133326号には、セル（直交格子）を用いて解析領域を分割し、このセルに体積率を記憶させ、形状計算（シミュレーション）がすべて終了するまでセルを変更せずに保つ形状シミュレーション方法が開示されている。しかし、従来の形状シミュレーション方法においては、形状計算がすべて終了するまで一度設定されたセルを変更しないため、界面の形状の変化と事実上関係しない物質の界面から遠く離れた位置にもセルが設定されたままとなる。この結果、そのような物質の界面から遠く離れた位置のセルに体積率を記憶させておく分だけ記憶容量が必要以上に要することになるという問題があった。

【0003】

【発明が解決しようとする課題】上述のように、従来の形状シミュレーション方法は、形状計算がすべて終了するまで一度設定されたセルを変更しないため、物質の界面から遠く離れた位置にもセルが設定されたままとなり、記憶容量が必要以上に要するという問題があった。そこで、本発明の目的は、上記問題を解決するためになされたものであり、物質の形状を表わすのに必要な界面付近だけに格子を生成し、界面の形状を更新した後、当該格子の生成および形状の更新を所定の時間毎に形状計算がすべて終了するまで複数回繰り返すことにより、記憶容量を必要以上に要することがない形状シミュレーション方法、装置および記録媒体を提供することにある。

【0004】

【課題を解決するための手段】本発明の形状シミュレーション方法は、物質の界面の形状をシミュレーションする形状シミュレーション方法において、物質の界面近傍を格子点と該格子点を結ぶ格子線とにより囲まれた所定の形状の格子を用いて分割し、物質の界面の形状を該格子線上に置かれた頂点を結んで表す界面分割ステップと、格子点近傍における物質の特性を示す特性値を該格子点に記憶させる特性値記憶ステップと、格子点に記憶

された特性値を所定の時間毎に更新し、該所定の時間毎に物質の界面の形状が更新される形状更新方向へ該頂点の位置を更新して物質の界面の形状を更新する形状更新ステップとを備えている。

【0005】ここで、前記界面分割ステップは、物質の界面が2次元で表わされている場合に、前記格子点から前記格子線が4分木で分岐する分割を行うことができる。

【0006】ここで、前記界面分割ステップは、物質の界面が3次元で表わされている場合に、前記格子点から前記格子線が8分木で分岐する分割を行うことができる。

【0007】ここで、前記特性値記憶ステップは、物質の界面近傍の格子のみを囲む格子点に特性値を記憶させることができる。

【0008】ここで、前記特性値は格子点近傍の材質の割合を示す物質構成比であり、前記形状更新ステップは、頂点を基準として所定の小形状を発生させ、形状更新方向において該所定の小形状と格子線との交点を求め、該交点を挟む2個の格子点に各々記憶された物質構成比が該交点において等値となるように線形補間法により各々更新し、物質構成比が等値となった該交点を新たな頂点として更新して物質の界面の形状を更新することができる。

【0009】ここで、前記形状更新ステップは、前記格子線上に複数個の交点が求められた場合に、前記形状更新方向が物質の界面から見て内側方向である場合は、複数個の交点から得られる物質構成比の内最小の物質構成比により更新することができる。

【0010】ここで、前記形状更新ステップは、前記格子線上に複数個の交点が求められた場合に、前記形状更新方向が物質の界面から見て外側方向である場合は、複数個の交点から得られる物質構成比の内最大の物質構成比により更新することができる。

【0011】ここで、前記特性値は格子線上の所定の点から該所定の点を挟む2個の格子点までの各距離であり、前記形状更新ステップは、物質の界面を前記形状更新方向へ所定の距離移動させた場合に、該物質の界面と移動させた所定の距離とから形成される多面体の表面と格子線との交点を求め、該交点から該交点を挟む2個の格子点までの各距離を該格子点が該多面体の内部にある場合は正とし該多面体の外部にある場合は負として求めて、各格子点に記憶させる新たな特性値として更新することができる。

【0012】ここで、前記格子点に複数個の距離が求められた場合は、複数個の距離の平均値により更新することができる。

【0013】ここで、前記界面分割ステップは、物質の界面を3次元で表わし該界面近傍を格子点から格子線を8分木で分岐させて所定の形状の格子に分割し、該格子

毎に頂点を含み正の体積を有するコントロールボリュームを定義し、前記特性値記憶ステップは、前記コントロールボリューム内における前記頂点を含む所定の体積が該コントロールボリュームの体積に対して占める割合を求め、該割合を物質構成比を示す特性値として格子点に記憶させ、前記形状更新ステップは、前記頂点を含む所定の体積に対して物質構成比が等値となる等値面を求め、該等値面に対して前記形状更新方向へ流れ込む物質質量を前記頂点へ流れ込む物質質量として求め、該流れ込む物質質量により格子点に記憶された物質構成比を更新して物質の界面の形状を更新することができる。

【0014】ここで、前記形状シミュレーション方法は、半導体のプロセス設計における素子の形状シミュレーション方法であり、前記形状更新方向は、エッチングプロセスの場合は物質の界面からみて内側方向であり、薄膜堆積プロセスの場合は物質の界面からみて外側方向であることができる。

【0015】この発明の記録媒体は、上述の形状シミュレーション方法を実行するためのプログラムを記録したコンピュータ読み取り可能な記録媒体である。

【0016】この発明の形状シミュレーション装置は、物質の界面の形状をシミュレーションする形状シミュレーション装置において、物質の界面近傍を格子点と該格子点を結ぶ格子線とにより囲まれた所定の形状の格子を用いて分割し、物質の界面の形状を該格子線上に置かれた頂点を結んで表す界面分割手段と、格子点近傍における物質の特性を示す特性値を該格子点に記憶させる特性値記憶手段と、格子点に記憶された特性値を所定の時間毎に更新し、該所定の時間毎に物質の界面の形状が更新される形状更新方向へ該頂点の位置を更新して物質の界面の形状を更新する形状更新手段とを備えている。

【0017】ここで、前記特性値は格子点近傍の材質の割合を示す物質構成比であり、前記形状更新手段は、頂点を基準として所定の小形状を発生させ、形状更新方向において該所定の小形状と前記格子線との交点を求め、該交点を挟む2個の格子点に各々記憶された物質構成比が該交点において等値となるように線形補間法により各々更新し、物質構成比が等値となった交点を新たな頂点として更新して物質の界面の形状を更新することができる。

【0018】ここで、前記特性値は格子線上の所定の点から該所定の点を挟む2個の格子点までの各距離であり、前記形状更新手段は、物質の界面を前記形状更新方向へ所定の距離移動させた場合に、該物質の界面と移動させた所定の距離とから形成される多面体の表面と格子線との交点を求め、該交点から該交点を挟む2個の格子点までの各距離を該格子点が該多面体の内部にある場合は正とし該多面体の外部にある場合は負として求めて、各格子点に記憶させる新たな特性値として更新することができる。

【0019】ここで、前記界面分割手段は、物質の界面を3次元で表わし該界面近傍を格子点から格子線を8分木で分岐させて所定の形状の格子に分割し、該格子毎に前記頂点を含み正の体積を有するコントロールボリュームを定義し、前記特性値記憶手段は、前記コントロールボリューム内における前記頂点を含む所定の体積が該コントロールボリュームの体積に対して占める割合を求め、該割合を物質構成比を示す特性値として格子点に記憶させ、前記形状更新手段は、前記頂点を含む所定の体積に対して物質構成比が等値となる等値面を求め、該等値面に対して前記形状更新方向へ流れ込む物質量を前記頂点へ流れ込む物質量として求め、該流れ込む物質量により格子点に記憶された物質構成比を更新して物質の界面の形状を更新することができる。

【0020】

【発明の実施の形態】以下、図面を参照して、本発明の実施の形態を詳細に説明する。

【0021】実施の形態1. 図1は、本発明の以下の実施の形態における形状シミュレーションで共通して用いられる形状シミュレーション装置150のブロック図を示す。図1において、本発明の形状シミュレーション方法は、コンピュータ・プログラムとしてROM (Read Only Memory) 215、ディスク230またはフロッピー（登録商標）ディスクFD 245に記録されている。このコンピュータ・プログラムは、ディスク230からはコントローラ225を介して、フロッピーディスクFD 245からはコントローラ240を介して、各々バス255を通りRAM (Random Access Memory) 220へロードされる。CPU (Central Processing Unit) 210はRAM 220内のコンピュータ・プログラムを実行することにより、入出力インタフェース250を介して、外部の入力装置120（不図示）から形状シミュレーションに必要なパラメータ等のデータを入力し、形状シミュレーションの演算結果を外部の表示装置140（不図示）へ表示させる信号を出力する。

【0022】図2は、本発明の実施の形態1における2次元形状シミュレーションに用いられる格子の概念図を示す。図2において、符号5は2次元形状シミュレーションで4分木により分割されて解析の対象となる計算領域、7、17は計算領域5を分割した格子（直交格子）、7は最小の格子である最小格子、13、14は格子17を囲む4個の格子点のうちの各格子点、14は格子点13と14とを結ぶ格子線、10は物質の表面形状、11は表面形状10と格子線との交点であり物質の表面形状における頂点である。最小格子7の幅（最小格子幅）は例えば5Åないし100Å程度であり、計算領域5の大きさ、精度および計算機のメモリ容量等を考慮して決定される。図2に示されるように、表面形状（以下「形状」と略する）10の近傍の領域は最小格子7（直交格子）を用いて分割され、形状10から遠く離れ

た領域は、最小格子7より大きい直交格子17または三角格子18等により分割されている。このように本発明の実施の形態においては、直交格子ではない格子を用いることもできる。最小格子7は、形状10を一回更新させた場合に形状10が移動する距離程度の領域だけに発生させて、形状10を更新する。格子7、17等の近傍にある物質の特性を示す特性値としては、物質の材質構成比、体積率、存在率または体積密度等を用いることができる。本実施の形態1では、格子点13等に0から1の値の特性値（材質構成比、体積率または存在率等）を記憶させる。格子点13等を囲む所定の体積のコントロールボリューム等のセルを定義できる場合は、特性値が0であることはコントロールボリュームにその材質が存在しないことを意味し、特性値が1であることはコントロールボリュームにその材質が完全に詰まっていることを意味する。特性値が0.2または0.7等の0と1との間の中間の値である場合は、特性値はコントロールボリュームにおけるその材質の存在率を表わしているものとする。形状10は特性値が0.5となる等値面で表現することができる。格子点13等を囲むコントロールボリューム等のセルを定義できない場合は、格子点13等に記憶された特性値は材質構成比等の値ではなく、単に等値面形状を表現する上での値とする。この場合特性値が0.5の等値面は、隣接する格子点間で各格子点に記憶された特性値を線形補間することにより求める。

【0023】図3(A)および(B)は、本発明の実施の形態1における形状更新方法であって、図3(A)はエッチング工程の場合を示し、図3(B)は薄膜堆積工程の場合を示す。図3(A)および(B)において、符号34はエッチング工程または薄膜堆積工程の対象となる物質の内部、30は空気、32は物質34と空気30との界面である物質34の形状、31は形状32上にある物質34の頂点、36は物質34の内部に設定された三角格子、AおよびBは格子点、37は格子点Aと格子点Bとを結ぶ格子線、Pは特性値（材質構成比等）が0.5となる等値面と格子線37とが交差する交点である。図3

(A)と(B)との相違は、図3(A)では三角格子36が物質34内にあるのに対して、図3(B)では空気330中にある点である。図3(A)に示されるように、等方性エッチング工程の場合は、形状32を表現する頂点31で円Cを発生させ、円Cと各格子線、例えば格子線37と交差する点Pの特性値を0.5とする。次に以下の方法により交点Pを挟む格子点AおよびBにおける物質34の材質構成比を求める。円Cの半径は、図3(A)の場合はエッチング速度を $v$ 、図3(B)の場合は堆積速度を $v$ とし、シミュレーションの微小時間ステップ幅を $\Delta t$ とすると、ほぼ $v \Delta t$ 程度が好適である。しかし、最小格子幅を考慮した上で $v \Delta t$ より多少大きくても小さくても良い。本発明の実施の形態1における形状更新方法は、形状32を構成する線の一部(2

次元であれば線素、3次元であれば面素。以下単に「面素」というのを各面素に対して垂直な方向に距離 $v \Delta t$ だけ動かして、各面素と格子線37等とが交差する交点P等における特性値を0.5として、交点P等を挟む格子点AおよびB等における物質34の材質構成比を求めるものである。以下、交点Pを挟む格子点AおよびBにおける物質34の材質構成比を求める方法を説明する。

【0024】図3(A)または(B)において、格子線37(格子線AB)を線分APと線分BPとに分割し、

$$c(P) = 0.5 = c(A) \cdot (1-s) + c(B) \cdot s \quad (1)$$

$$\text{ここで、} s = a / (a + b) \quad (2)$$

【0026】を解いて得られる。式(2)のsを0.5と比較して、

(i)  $s < 0.5$  の場合

$$c(B) = 1.0 \text{ とし、} c(A) = (0.5 - s) / (1 - s) \quad (3)$$

【0028】と求め、

【0029】

(ii)  $s \geq 0.5$  の場合

$$c(A) = 0.0 \text{ とし、} c(B) = 0.5 / s \quad (4)$$

【0030】と求める。

【0031】図4は、本発明の実施の形態1において各格子点における材質構成比が多重に求まる場合を示す。図4において、符号40は形状、41および42は格子線、45は $v \Delta t$ 、47および48は頂点、A1、A2、A3、B1、B2およびB3は格子点、P1は頂点47から発生させた円C1が格子線41(線分A1B1)と交差する交点、P2は頂点48から発生させた円C2が格子線41(線分A2B2)と交差する交点、P3は頂点48から発生させた円C3が格子線42(線分A3B3)と交差する交点、である。格子点A1およびA2、格子点B1およびB2はそれぞれ同一の点であるが、説明の都合上名前を分けてある。図4に示される線分A1B1等の値から、格子線41上の交点P1に対応する格子点A1およびB1に対する $c(A1)$ 、 $c(B1)$ を求めると、式(2)より $s = 3 / (3 + 5) = 0.375 < 0.5$ となる。したがって、式(3)より $c(B1) = 1.0$ 、 $c(A1) = (0.5 - 0.375) / (1 - 0.375) = 0.2$ と求まる。一方、格子線41上には他の頂点48から発生させた円C2に対する交点P2があるため、この交点P2に対応する格子点A2およびB2に対する $c(A2)$ 、 $c(B2)$ を求めると、式(2)より $s = 2 / (2 + 6) = 0.25 < 0.5$ となる。従って、式(3)より $c(B2) = 1.0$ 、 $c(A2) = (0.5 - 0.25) / (1 - 0.25) = 0.3$ と求まる。 $c(B1) = c(B2) = 1.0$ であるが、 $c(A1) = 0.2$ と $c(A2) = 0.3$ とは異なるため格子点A1(=A2)における特性値(材質構成比)が多重に求まることになる。この場合、エッチング工程であれば、材質構成比の小さい方を優先し、堆積(デポジション)工程であれば材質構成比の大

線分APの長さをa、線分BPの長さをb、格子点A、Bおよび交点Pにおける特性値を各々 $c(A)$ 、 $c(B)$ および $c(P)$ とする。交点Pは、上述のように特性値(材質構成比等)が0.5となる等値面と格子線37等とが交差する交点であるから、 $c(P) = 0.5$ とすると、 $c(A)$ 、 $c(B)$ は、

【0025】

【数1】

【0027】

【数2】

【数3】

きい方を優先する。 $c(A1) = 0.2 > c(A2) = 0.3$ であるから、エッチング工程であれば、格子点A1(=A2)における材質構成比は0.2とし、堆積(デポジション)工程であれば材質構成比は0.3とする。上述のようにして形状の更新を行った後、所定の時間 $\Delta t$ 毎に形状シミュレーションがすべて終了するまで複数回繰り返す。

【0032】図5は、本発明の実施の形態1における形状更新方法を行うフローチャートを示す。図5に示されるように、まず $AP = a$ 、 $BP = b$ 、 $c(P) = 0.5$ とする(ステップS510)。次に $s = a / (a + b)$ を求める(ステップS520)。sの値を判断して(ステップS530)、 $s < 0.5$ である場合は $B = 1.0$ (ステップS560)とし $A = (0.5 - s) / (1 - s)$ とする(ステップS570)。 $s \geq 0.5$ である場合は $A = 0.0$ とし(ステップS540)、 $B = 0.5 / s$ とする(ステップS550)。図5に示されるフローチャートにより形状の更新を行った後、所定の時間 $\Delta t$ 毎に形状シミュレーションがすべて終了するまで図5に示される処理を複数回繰り返す。

【0033】上述の説明では、等方性エッチング工程に対しては頂点47等を中心として円C1等の小形状を発生させたが、発生させる小形状としては異方性エッチング工程に対しては楕円、長方形、菱形または平行四辺形を発生させることも可能である。3次元空間における等方性エッチング工程または等方性デポジション工程に対しては球を発生させ、異方性エッチング工程または異方性デポジション工程に対しては直方体または角柱を発生させることも可能である。複数の材質表面形状が同時に移動する場合、例えば被エッチング材質のエッチング工程だけでなく、ポリマーの側壁のデポジション工程も同



時に起きる現象等の場合は、各格子点における各材質構成比（空気の構成比も含めたもの）をすべて加えたものが1になるようにすることにより、各微小時間ステップ毎に格子を生成しなくても材質界面を特定することができる。本実施の形態1に示された形状更新方法は、3次元の8分木格子分割または四面体等の格子分割においても同様にして用いることが可能であり、必要なメモリ容量の削減と処理速度の高速化が実現できる。

【0034】以上より、実施の形態1によれば、物質の形状を表わすのに必要な界面付近だけに格子を生成し、界面の形状上の頂点から発生させた円等の小形状と格子線との交点を求め、この交点における特性値を0.5として交点を挟む格子点における物質の材質構成比等の特性値を求めることができるので、特性値が等値である等値面によって更新後の物質界面の形状を表現することができる。

【0035】実施の形態2. 実施の形態2における形状シミュレーション方法は、物質の界面をその形状が更新される方向（形状更新方向、例えばエッチングされる方向）へ所定の距離（例えばエッチングされる距離）だけ移動させた場合に、まずその物質の界面と移動させた所定の距離とから形成される多面体を求める。次に、その多面体の表面と格子線との交点を求めて、その交点から交点を挟む2個の格子点までの各距離をレベルセット関数の値として設定する。ただし、格子点がその多面体の内部にある場合は距離を正とし、多面体の外部にある場合は距離を負としてレベルセット関数の値を設定し、各格子点に記憶させる。

【0036】図6(A)(B)は、本発明の実施の形態2におけるレベルセット関数の設定を示す。図6(A)(B)において、A、B、CまたはDは格子点、線分AB等は格子線、Pは上述の多面体の表面と格子線との交点である。図6(A)に示されるように、交点Pから交点を挟む2個の格子点A、Bまでの各距離 $d(P)$ は0.8、0.3である。格子点Aは多面体の外部にあるためレベルセット関数 $f(P)$ は $-d(P) = -0.8$ と設定されて、格子点Aに $-0.8$ が記憶される。格子点Bは多面体の内部にあるためレベルセット関数 $f(P)$ は $+d(P) = +0.3$ と設定され、格子点Bに $+0.3$ が記憶される。同様にして、格子点Dには $-0.2$ 、格子点Cには $+0.8$ が記憶される。上述のように、レベルセット関数の値を交点Pから格子点A等までの距離 $d(P)$ で与えることにより、簡単に設定することが可能である。

【0037】図6(B)は、2つ以上の格子線が1つの格子点から出ている場合を示す。図6(B)に示されるように、格子点Cからは、線分CB、線分CAおよび線分CDの3つの格子線が出ており、各格子線に対応して、格子点Cに記憶されるレベルセット関数の値は各々0.75、0.4または0.8となる。このように複数

のレベルセット関数 $f(P)$ の値が現れた場合は、優先度を決める方法もあるが、例えば複数のレベルセット関数 $f(P)$ の値の平均値を求めて、格子点Cに設定する方法もある。平均値を求めて設定値とする方法であれば、格子点Cには $(0.75 + 0.4 + 0.8) / 3 = 0.65$ が記憶される。

【0038】図7は本発明の実施の形態2におけるレベルセット関数 $f(P)$ の設定方法をフローチャートで示す。図7に示されるように、格子点Pから格子点Aまでの距離 $d(P)$ を求め（ステップS700）、格子点Aが多面体の外側かどうかに応じて（ステップS710）、外側であれば $f(P) = -d(P)$ と求め（ステップS720）、内側であれば $f(P) = +d(P)$ と求める（ステップS730）。求められたレベルセット関数 $f(P)$ は格子点Aに設定される（ステップS740）。ここで、格子点Aに複数のレベルセット関数 $f(P)$ が設定される場合は（ステップS750）、複数のレベルセット関数 $f(P)$ の平均値を求めて格子点Aに記憶させるレベルセット関数値とする（ステップS760）。レベルセット関数値が1つである場合は、そのまま処理を終了する。

【0039】以上より、実施の形態2によれば、レベルセット関数の値を交点Pから格子点A等までの距離 $d(P)$ で与えることにより、簡単に設定することが可能である。複数のレベルセット関数 $f(P)$ の値が現れた場合であっても、例えば複数のレベルセット関数 $f(P)$ の値の平均値を求めて、格子点に設定することができる。

【0040】実施の形態3. 実施の形態3における形状シミュレーション方法は、物質の界面を分割する場合に、物質の界面を3次元で表わして、その界面近傍を、格子点から格子線を8分木で分岐させて所定の形状の格子に分割する方法である。本実施の形態3では、格子毎に頂点を含み正の体積を有するコントロールボリューム（Control Volume: CV）を定義できる場合に可能な方法である。本実施の形態3における形状シミュレーション方法の概略を述べると、コントロールボリューム内における格子点を含む所定の体積がコントロールボリュームの体積に対して占める割合を求め、この割合を物質構成比を示す特性値として格子点に記憶させる。形状更新は、頂点を含む所定の体積に対して物質構成比が等値となる等値面を求めて、この等値面に対して形状を更新する方向（形状更新方向、例えばエッチングされる方向）へ流れ込む物質量を頂点へ流れ込む物質量として求める。この流れ込む物質量により格子点に記憶された物質構成比を更新して、物質の界面の形状を更新するものである。

【0041】図8は、本発明の実施の形態3におけるコントロールボリュームCVを四面体に分割して等値面を導出する方法を示す。図8において、A、B、C、Dは

四面体ABCDを構成する格子点、線分AB、AC、AD、BD、BCまたはCDは格子線である。図8に示されるように、四面体ABCD内に定義されるコントロールボリュームCV50（後述）を格子点Aを囲む6つの四面体、すなわちコントロールボリュームCV50内における上述の所定の体積に分割する。四面体ABCDにおいて、線分（稜線）ABの中点をP、線分（稜線）ACの中点をQ、線分（稜線）ADの中点をRとし、中点Pを通り稜線ABを垂直2等分する平面を $\alpha$ 、中点Qを通り稜線ACを垂直2等分する平面を $\beta$ 、中点Rを通り稜線ADを垂直2等分する平面を $\gamma$ とする。これらの3

$$b \cdot (x - b / 2) = 0 \quad (5)$$

$$c \cdot (x - c / 2) = 0 \quad (6)$$

$$d \cdot (x - d / 2) = 0 \quad (7)$$

【0043】この3つの式（5）ないし（7）を満たすxは、以下の式（8）で示される。

$$\begin{aligned} x = & \{ |b| \cdot (c \times d) \} / \{ 2b \cdot (c \times d) \} \\ & + \{ |c| \cdot (d \times b) \} / \{ 2c \cdot (d \times b) \} \\ & + \{ |d| \cdot (b \times c) \} / \{ 2d \cdot (b \times c) \} \end{aligned} \quad (8)$$

【0045】 $\triangle ABC$ 、 $\triangle ACD$ 、 $\triangle ADB$ の外心を各々 $G_{ABC}$ 、 $G_{ACD}$ 、 $G_{ADB}$ とすると、6つの四面体 $APG_{ABC}$  X、 $AQG_{ABC}$  X、 $AQG_{ACD}$  X、 $ARG_{ACD}$  X、 $ARG_{ADB}$  X、 $APG_{ADB}$  Xが、四面体ABCDの格子点Aを含むコントロールボリューム50を形成していることがわかる。以上のようにして、一般的な四面体内のコントロールボリュームをさらに複数の四面体に分割できる。この分割された複数の四面体に対して、等体積率面（等値面）は容易に計算可能である。その理由は以下の通りである。

【0046】A、Bの体積率 $c(A)$ 、 $c(B)$ が既知であることおよびPが中点であることから $c(P) = 0.5$ が求まる。BC間の中点kの体積率 $(c(k) = (c(B) + c(C)) / 2)$ を求め、 $c(k)$ と $c(A)$ とから $c(G_{ABC})$ を求める。式（8）よりXの座標がわかるので $c(X)$ を求める。このようにして四面体 $APG_{ABC}$  Xの各点（頂点）の体積率を求める。その後、AP間で体積率 $c(P1) = 0.5$ となる点P1を、式（1）により、 $c(P1) = 0.5 = c(A) \cdot (1 - s1) + c(P) \cdot s1$ とし、s1から点P1の位置を求める。格子点Aと頂点 $G_{ABC}$ との間においても同様にして体積率=0.5となる点P2等が求められる。このようにして求められた体積率=0.5となる点P1、P2等をつなぐことにより、四面体 $APG_{ABC}$  Xの等体積率面を求めることができる。

【0047】CD間の中点j、BD間の中点i等を利用することにより、同様にして、分割された他の四面体A

つの平面は、四面体ABCD内部の点Xで交わる。この点Xの座標を、以下四面体ABCDの各格子点の座標で記述する。四面体ABCDの各格子点A、B、CまたはD、点Xの座標をベクトルとして、各々a、b、c、dまたはxとする。ここで格子点Aを原点、すなわち $a = (0, 0, 0)$ として格子点Aを囲むコントロールボリューム40を考えると、ベクトルb、c、dまたはxは次の式（5）ないし（7）を満たす。

【0042】

【数4】

【0044】

【数5】

$QG_{ABC}$  X等についても、CD間の中点j等の体積率 $c(j)$ 等を求め、 $c(j)$ と $c(A)$ とから $c(G_{ACD})$ を求め、体積率面を求めることができる。したがって格子点Aを囲むコントロールボリュームCV50内の等体積率面、つまり物質表面を求めることができる。その物質表面に流入または流出する物質量は格子点Aに流入または流出する物質量とすることができるので、格子点Aにおける体積率を短い時間 $\Delta t$ 毎に更新することができる。

【0048】図9は、本発明の実施の形態3における形状シミュレーション方法のフローチャートを示す。図9において、まず四面体ABCDにおける稜線AB、AC、ADの各中点P、Q、Rを求める（ステップS900）。次に各中点P、Q、Rを通り各稜線AB、AC、ADを垂直2等分する平面 $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$ を求める（ステップS910）。四面体ABCDの頂点（格子点）Aの内部で平面 $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$ が交わる点Xを求める（ステップS920）。 $\triangle ABC$ 等の外心 $G_{ABC}$ 等を求め、四面体 $APG_{ABC}$  X等の複数の分割された四面体を求める（ステップS930）。複数の分割された四面体 $APG_{ABC}$  X等に対して等体積率面（等値面）を求める（ステップS940）。この等値面は物質表面であるため、物質表面に流入または流出する物質量は格子点Aに流入又は流出する物質量である。このようにして格子点Aにおける体積率を短い時間 $\Delta t$ で更新することができる（ステップS950）。

【0049】以上より、実施の形態3によれば、格子点Aを囲む四面体内のコントロールボリュームをさらに複数の四面体に分割できる。この分割された複数の四面体

に対して等体積率面（等値面）を容易に計算することができるため、格子点Aを囲む物質表面が計算できる。その物質表面に流入または流出する物質量は格子点Aに流入または流出する物質量とすることができるので、格子点Aにおける体積率を短い時間 $\Delta t$ 毎に更新することができる。

【0050】実施の形態4. 図10は本発明の実施の形態4における2次元空間で形状シミュレーションを行う場合の一例を示す。図5において、横軸は3次元空間（xyz空間）におけるx方向の格子に付けられた格子点番号（1～i）、縦軸はz方向の格子に付けられた格子点番号（1～k）、7は最小格子、10は物質界面の形状を示す。

【0051】図10に示されるように、形状シミュレーションの基準となる格子（メッシュ）を変更せずに形状シミュレーションの計算を行う場合、xz平面の全領域の格子のデータを記憶せずに、物質界面の形状10が存在する格子の左右上下（3次元であれば前後も含む）を例えば3格子程度ずつ記憶させる。記憶方法としては、xおよびz方向（3次元であればy方向も含む）の各格子点番号 $i=n$ 、 $k=n$ （3次元であればy方向の格子点番号 $j=n$ も含む）とその格子点における材質構成比 $c(n, m)$ を記憶させることができる。ここでnは記憶する格子点の通し番号、mは材質番号（シリコン（silicon）=1、酸化膜（oxide）=2等）を表す。形状を更新する場合は、記憶された格子点の中で形状10が3格子以内で移動（更新）するように微小時間 $\Delta t$ を決定する。形状を移動（更新）する方法は上述の実施の形態1等々に示された方法等を用いることが可能である。一度移動させた界面または物質表面に対して、そのたびに記憶する格子点を再決定する。これをエッチング時間またはデポジション時間が終了するまで繰り返し行うことにより、求める形状を得ることができる。

【0052】上述の説明では記憶させる格子の数として3格子程度としたが、この値は例示のための数値であって、形状を更新する微小時間 $\Delta t$ により変化し得るものである。好適には、形状更新方向への形状10の移動速度を $v$ とすると、 $v\Delta t$ の範囲の格子の数程度が望ましい。

【0053】以上より、実施の形態4によれば、形状シミュレーションの基準となる格子（メッシュ）を変更せずに形状シミュレーションの計算を行う場合、xz平面の全領域の格子のデータを記憶せずに、物質界面の形状が存在する格子の左右上下（3次元であれば前後も含む）を例えば3格子程度ずつ記憶させることにより、少ない記憶量で形状更新のシミュレーションを行うことができる。

【0054】上述した各実施の形態1等の機能を実現するコンピュータ・プログラムを記録した記録媒体245等を形状シミュレーション装置150に供給し、その形

状シミュレーション装置150のCPU210が記録媒体245等に格納されたコンピュータ・プログラムを読み取り実行することによっても、本発明の目的が達成されることは言うまでもない。この場合、記録媒体245等から読み取られたコンピュータ・プログラム自体が本発明の新規な機能を実現することになり、そのコンピュータ・プログラムを記録した記録媒体245等は本発明を構成することになる。コンピュータ・プログラムを記録した記録媒体としては、フロッピーディスクFD245の他に、例えば、CD-ROM、ハードディスク230等、ROM220、メモ리카ード、光ディスク等を用いることができる。

【0055】

【発明の効果】以上説明したように、本発明の形状シミュレーション方法、装置および記録媒体によれば、物質の形状を表わすのに必要な界面付近だけに格子を生成し、界面の形状を更新した後、当該格子の生成および形状の更新を所定の時間毎に形状計算がすべて終了するまで複数回繰り返すことにより、記憶容量を必要以上に要することがない形状シミュレーション方法、装置および記録媒体を提供することができる。

【図面の簡単な説明】

【図1】 本発明の各実施の形態における形状シミュレーションで共通して用いられる形状シミュレーション装置のブロック図である。

【図2】 本発明の実施の形態1における2次元形状シミュレーションに用いられる格子の概念図である。

【図3】 本発明の実施の形態1における形状更新方法を示す図である。

【図4】 本発明の実施の形態1において各格子点における材質構成比が多重に求まる場合を示す図である。

【図5】 本発明の実施の形態1における形状更新方法を示すフローチャートである。

【図6】 本発明の実施の形態2におけるレベルセット関数の設定を示す図である。

【図7】 本発明の実施の形態2におけるレベルセット関数 $f(P)$ の設定方法を示すフローチャートである。

【図8】 本発明の実施の形態3におけるコントロールボリュームCVを四面体に分割して等値面を導出する方法を示す図である。

【図9】 本発明の実施の形態3における形状シミュレーション方法を示すフローチャートである。

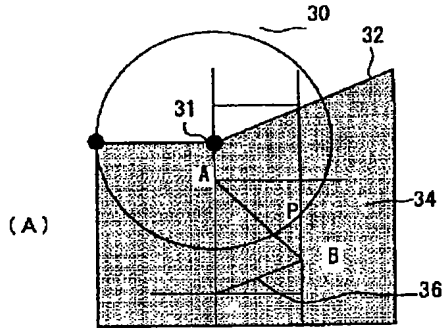
【図10】 本発明の実施の形態4における2次元空間で形状シミュレーションを行う場合の一例を示す図である。

【符号の説明】

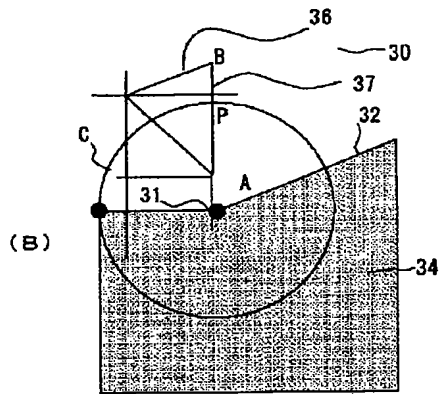
5 計算領域、 7 最小格子、 10、32、40 物質表面形状、 11、31 頂点、 13、14 格子点、 15、37、41、42 格子線、17 直交



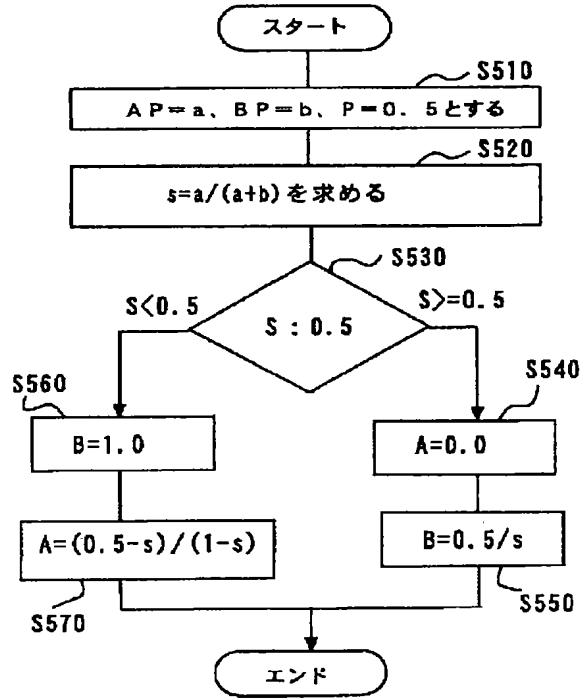
【図3】



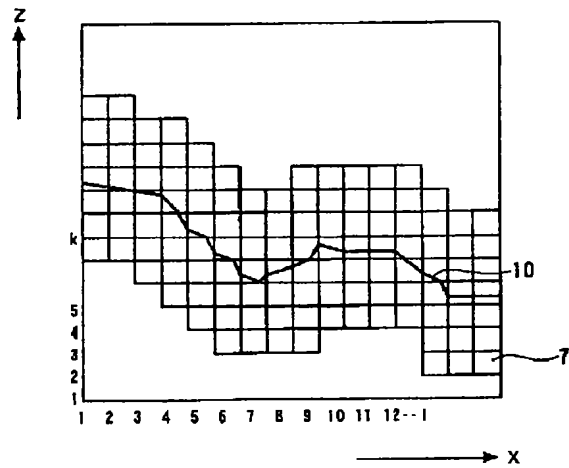
30:空気 36:三角格子  
31:頂点 37:格子線  
32:形状 A、B:格子点  
34:物質 P:交点



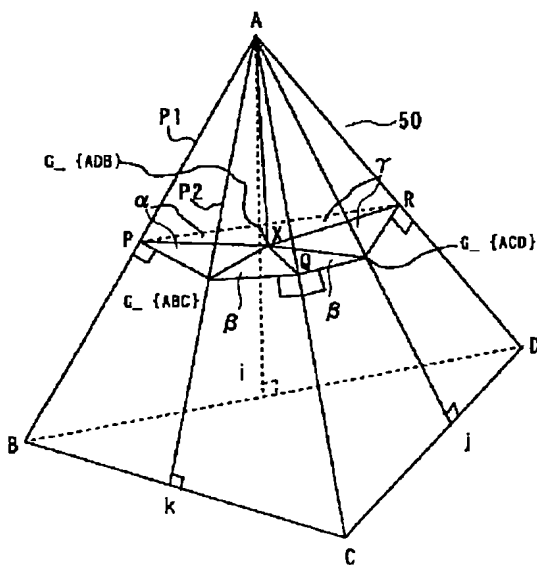
【図5】



【図10】

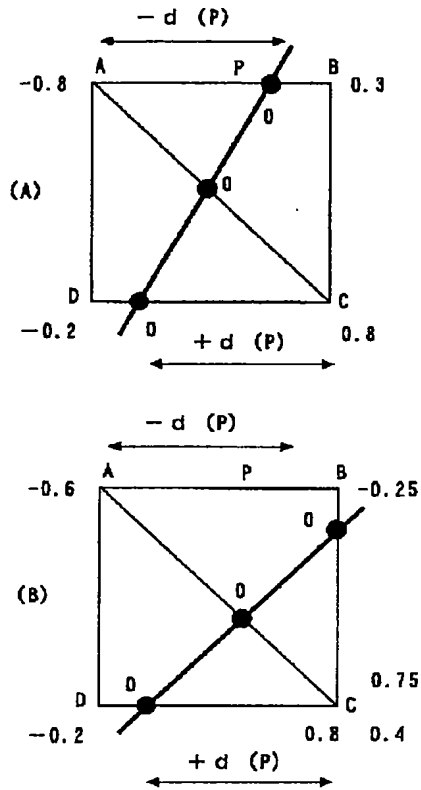


【図8】

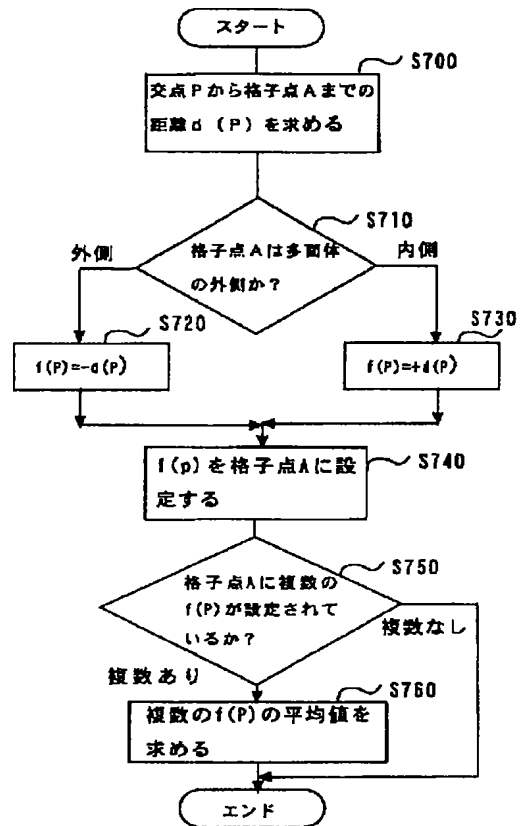


50:コントロールボリュームCV

【図6】



【図7】



【図9】

